

激光与光电子学进展

AlGaIn 紫外激光器量子垒层和 n 型波导层设计优化

刘璐, 李书平*

厦门大学物理科学与技术学院, 福建 厦门 361005

摘要 为提高紫外激光器的光电性能,降低阈值电流,提出采用 Al 组分渐变的量子垒层(QBs)以及 Al 组分渐变的 n 型波导层(n-WG)优化标准结构——参考实验样品设计的 AlGaIn 基紫外激光器结构,使用 PICS3D 仿真软件,对 3 种不同的新结构及标准结构进行构建和数值分析。比较了 4 种结构的 L-I-V 特性曲线、能带结构、载流子电流密度分布等性质,结果表明,同时采用 Al 组分渐变的 QBs 以及 Al 组分渐变的 n-WG 的紫外激光器具有更优异的性能:在 800 mA 注入电流下光输出功率可达 775 mW,与标准结构相比提高了 35.7%;阈值电流为 62.3 mA,与标准结构相比降低了 73.6%。

关键词 激光器与激光光学; AlGaIn; 紫外激光器; 量子垒层; n 型波导层; PICS3D

中图分类号 TN248

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP220591

Design Optimization of Quantum Barrier and n-Type Waveguide Layers of AlGaIn Ultraviolet Laser

Liu Lu, Li Shuping*

College of Physics and Technology, Xiamen University, Xiamen 361005, Fujian, China

Abstract To improve the photoelectric performance of an ultraviolet laser and reduce the threshold current obtained for standard structures, AlGaIn-based ultraviolet laser diodes with an Al-composition graded quantum barrier layer (QBs) and an Al-composition graded n-type waveguide layer (n-WG) are proposed. A standard structure is extracted and modified from an experimental sample. Three different new structures and the standard structure are constructed and numerically investigated using PICS3D simulation software. A comparison of the L-I-V characteristic curves, band structures, carrier current density distribution, and other properties of the four structures demonstrates that ultraviolet laser diodes with an Al-composition graded QBs and Al-composition graded n-WG exhibit improved performance. Under 800 mA injection current, the optical output power can reach 775 mW, which is 35.7% higher than that obtained for the standard structure; the threshold current decreases to 62.3 mA, which is 73.6% lower than that obtained for the standard structure.

Key words laser and laser optics; AlGaIn; ultraviolet laser diode; quantum barrier layer; n-type waveguide layer; PICS3D

1 引言

GaN 基半导体激光二极管(LD)由于其具有从蓝光到紫外的宽光谱范围、高光束质量、高效率、低成本等特性而备受关注^[1-4]。GaN 基 LD 在全彩显示、水下通信与探测、生物医疗、光学时钟等领域具有广泛的应用前景^[5-8],其中紫外 LD 由于波长较短、频率高、单光子能量高,能迅速地切断原子间的化学键而不产生大的热损伤,在材料加工、化学分析、小颗粒检测等方面有着十分重要的应用^[9-10]。紫外 LD 是结构较为复杂的紫外半导体光学器件之一,与 LED 相比,LD 在原

理上需要能提供有源区内载流子反转分布的泵浦源,还需要满足阈值条件以实现光增益大于光损耗等;在结构上 LD 比 LED 多出波导层、谐振腔等,因此紫外 LD 还存在许多有待解决的问题。

AlGaIn 基 LD 面对的主要问题^[11],首先是 p 型 AlGaIn 中 Mg 的活化能高^[12]导致 p 型掺杂效率低,晶体质量不高;其次空穴的迁移率低导致了空穴注入效率低以及载流子在有源区分布不均;还有由于电子泄漏会降低有源区的辐射复合效率;以及材料生长过程中不同材料的晶格失配形成非辐射复合中心消耗注入的载流子产生热量而不是光^[13]。为了更好地将载流子

收稿日期: 2022-01-20; 修回日期: 2022-02-12; 录用日期: 2022-02-21; 网络首发日期: 2022-03-10

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFB0400801, 2016YFB0400800)

通信作者: *lsp@xmu.edu.cn

限制于有源区以及提高载流子的注入效率, Liu 等^[10]提出量子阱的第一势垒掺杂水平显著影响 GaN 基激光器的载流子限制和分布; Hou 等^[14-15]提出采用阶梯式掺杂的下波导层, 通过调整波导层厚度与 p 型包层厚度和组分以及在最后一个量子垒层(LQB)和上波导层之间插入一个空穴存储层等来降低阈值电流密度以改进器件; Xing 等^[16]通过倒梯形电子阻挡层抑制电子泄漏, 降低阈值电流。为了更好地限制光场, Ben 等^[1]采用折射率较大的 InGaN 作为下波导层的非对称波导结构等。因此, 本文引入了一种既含有可以促进电子和空穴注入而抑制电子和空穴泄漏的渐变量子垒层(BQs)又含有抑制空穴泄漏促进电子注入的渐变的 n 型波导层(n-WG)的紫外激光二极管(UV-LD), 并设置多种结构通过 PICS3D 软件模拟计算进行比较和对照。本文中采用的标准结构是以 Yoshida 等^[17]所制备的 UV-LD 器件结构为基础, 将单量子阱结构调整为三量子阱结构, 其余厚度、组分等参数与实验样品参数一致。该 LD 对于化学及生物分析、高密度存储和材料处理等许多应用十分重要。故本文选取其课题组的样品做进一步的优化特性研究。

2 实验仿真

2.1 模拟结构和参数设置

本文模拟计算时采用的紫外 LD 结构示意图如图 1 所示, 对其进行模型构建, 标准结构从下往上依次

为: n 型 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 接触层, 厚度为 $2.8\ \mu\text{m}$, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$; n 型 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 覆盖层, 厚度为 $600\ \text{nm}$, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$; 下波导层是 $90\ \text{nm}$ 厚的 n 型 $\text{Al}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$; 有源区为 3 个周期的多量子阱, 由 4 个厚度为 $8\ \text{nm}$ 的 $\text{Al}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$ 势垒及 3 个厚度为 $3\ \text{nm}$ 的 $\text{Al}_{0.06}\text{Ga}_{0.94}\text{N}$ 势阱构成; 上波导层是 p 型 $\text{Al}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{N}$ 波导层, 厚度为 $120\ \text{nm}$, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$; p 型电子阻挡层(EBL)位于上波导层之上, 为 $20\ \text{nm}$ 厚的 $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, 掺杂浓度为 $5 \times 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$; p 型 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$ 覆盖层, 厚度为 $500\ \text{nm}$, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$; 最上面是 p 型 GaN 接触层, 厚度为 $25\ \text{nm}$, 掺杂浓度为 $1 \times 10^{18}\ \text{cm}^{-3}$, 前文中所用掺杂浓度参考了文献[18]。整个器件的脊宽为 $5\ \mu\text{m}$, 腔长为 $500\ \mu\text{m}$, 接触电极设为欧姆接触, 谐振腔的端面反射率为 0.35 。从图 1 中可以看出, 新结构 A 和标准结构只在前 3 个量子垒不同, 其余结构以及参数都相同, 新结构 A 的前 3 个量子垒层为 Al 组分为 $0.20 \sim 0.12$ 渐变的平均 Al 组分为 0.16 的结构, LQB 与标准结构相同。新结构 B 与标准结构仅在下波导层(n 型波导层)存在差异, 新结构 B 的 n 型波导层是 Al 组分为 $0.3 \sim 0.2$ 渐变的结构而标准结构是 Al 组分为 0.16 的体材料。新结构 C 则是既有 Al 组分为 $0.20 \sim 0.12$ 渐变的量子垒层又有 Al 组分为 $0.3 \sim 0.2$ 渐变的 n 型波导层, 与标准结构存在差异, 其余结构以及参数都相同。

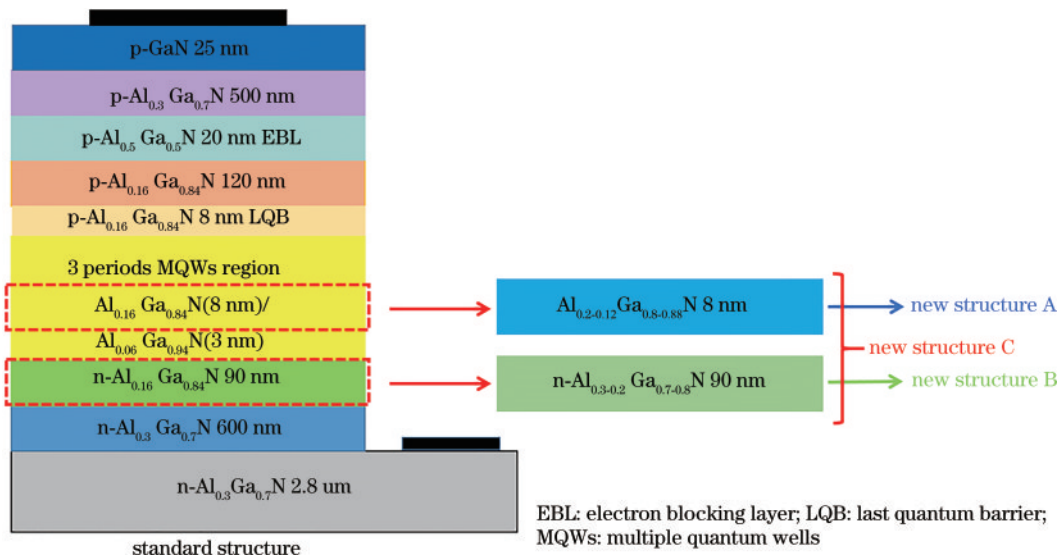


图 1 UV-LD 标准结构与新结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of UV-LD standard structure and new structures

本文采用 PICS3D 模拟软件进行模拟计算, 根据实验数据将 Shockley-Read-Hall (SRH) 复合寿命、俄歇复合系数分别设为 $1.5\ \text{ns}^{[19]}$ 、 $1 \times 10^{-30}\ \text{cm}^6/\text{s}^{[19]}$ 。由于考虑到 AlGaIn 合金异质界面的极化效应结合实际情况^[20], 将屏蔽因子设置成 $25\%^{[21]}$, AlGaIn 材料的能带偏移率设为 $0.65^{[22]}$ 。

3 分析与讨论

图 2 是由 PICS3D 模拟计算所得到的标准结构与 3 种新结构的 L-I-V 特性曲线图, 通过模拟得到不同注入电流下的激光器的发光光谱的半峰全宽(FWHM)数据, 随着电流增大, 相应发光光谱的

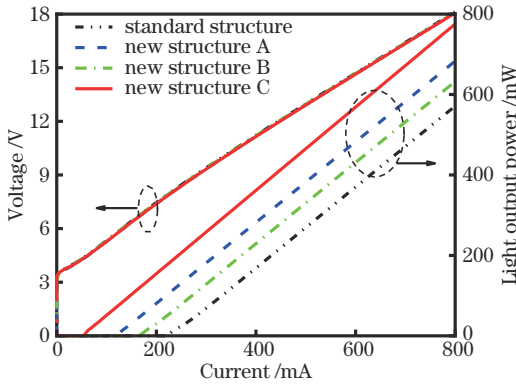


图 2 标准结构和 3 种新结构的 L-I-V 特性曲线

Fig. 2 L-I-V characteristic curves of standard structure and three new structures

FWHM 突然变小时的注入电流即为阈值电流,再从相应 I-V 特性曲线中根据阈值电流确定阈值电压的具体数值,表 1 中列出了 4 种结构的各项光电特性数值(如:阈值电流、斜率效率等)。根据表 1 了解到标

准结构紫外激光器的阈值电流为 236.5 mA,而新结构 A 紫外激光器的阈值电流为 132.5 mA,新结构 B 的阈值电流为 180.5 mA,新结构 C 的阈值电流为 62.3 mA。通过对半导体激光器的 L-I 特性曲线达到阈值电流之后的部分进行线性拟合可以求出相应的斜率效率,斜率效率的值越大,激光器的性能就越好。标准结构的斜率效率为 1.01 W/A,新结构 A 为 1.02 W/A,新结构 B 为 1.02 W/A,新结构 C 为 1.05 W/A;新结构 A、B 与标准结构相比斜率效率略有增大,而新结构 C 的斜率效率最大,与标准结构相比提高了约 3.96%。由图 2 可知,在 800 mA 电流注入下,标准结构的输出光功率为 571.2 mW,新结构 A 为 683.1 mW,提高了 19.6%;新结构 B 为 632.3 mW,提高了 10.7%;新结构 C 为 775.3 mW,提高了 35.7%。从表 1 的数据可以看出,新结构 C 的斜率效率和输出光功率较标准结构的提高比新结构 A 和新结构 B 两者的叠加略多,因此新结构 C 具有更优异的性能。

表 1 4 种结构的光电特性

Table 1 Photoelectric characteristics of four structures

Structure	Threshold voltage /V	Threshold current /mA	Slope efficiency / $(W \cdot A^{-1})$	Output optical power /mW
Standard structure	8.38	236.5	1.01	571.2
New structure A	5.98	132.5	1.02	683.1
New structure B	7.05	180.5	1.02	632.3
New structure C	4.49	62.3	1.05	775.3

图 3 是 800 mA 电流注入下 4 种结构的激光光谱图,计算出的光谱峰值及 FWHM 如图所示,标准结构的波长为 350.88 nm,新结构 A 的波长为 349.88 nm,新结构 B 的波长为 350.73 nm,新结构 C 的波长为 349.96 nm,4 种结构的波长都近似在 350 nm 左右。与标准结构相比,新结构 A 最高的光谱强度提高了 238%,新结构 B 提高了 79%,新结构 C 提高了 371%;同时 3 种新结构的 FWHM 与标准结构相比都有不同程度的减小,说明在新结构中前 3 个 Al 组分渐变的量子

垒层和渐变的较高 Al 组分 n 型波导层都能提升 LD 的发光效率,并且叠加以后效果更为明显。与上述结论相同,新结构 C 在 4 种结构中性能最为优异。

为了进一步探究新结构性能提升的原因,绘制了 800 mA 电流注入下标准结构的能带结构和新结构 C 的能带结构图,为了能清晰地看到新结构 C 和标准结构在改进部分的差异,分别截取了标准结构和新结构 C 量子阱区的能带结构,如图 4 和图 5 所示。通过截取

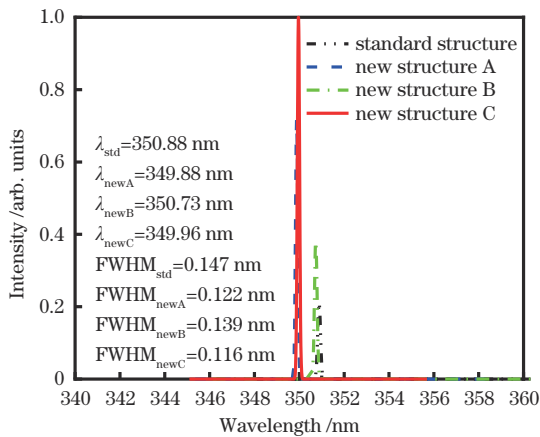


图 3 800 mA 电流注入下 4 种结构的激光光谱图

Fig. 3 Lasing spectra of four structures at current of 800 mA

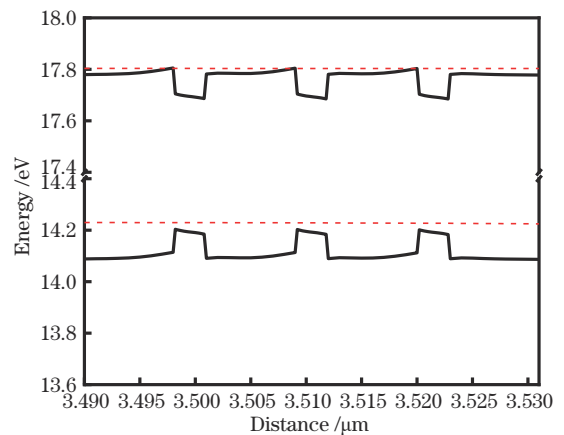


图 4 800 mA 电流注入下标准结构的能带图

Fig. 4 Energy band diagram of standard structures at current of 800 mA

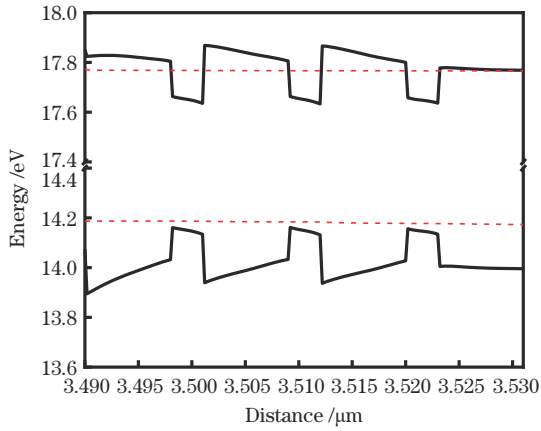


图 5 800 mA 电流注入下新结构 C 的能带图
Fig. 5 Energy band diagram of new structure C at current of 800 mA

新结构 C 和标准结构的量子阱区的能带结构图中可以看出,标准结构的第一个势垒层向上弯曲导致电子不易注入量子阱中,而新结构 C 通过渐变的势垒层,可以消除第一个势垒层向上弯曲的状态,更利于电子注入

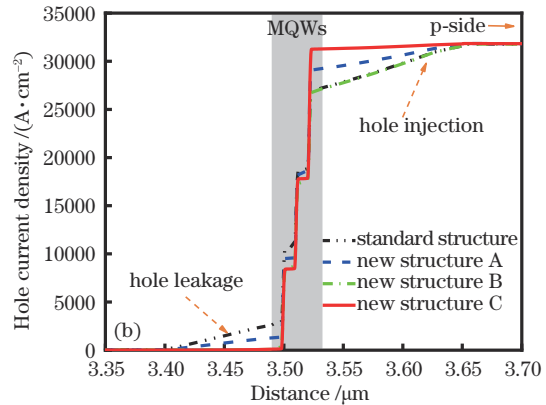
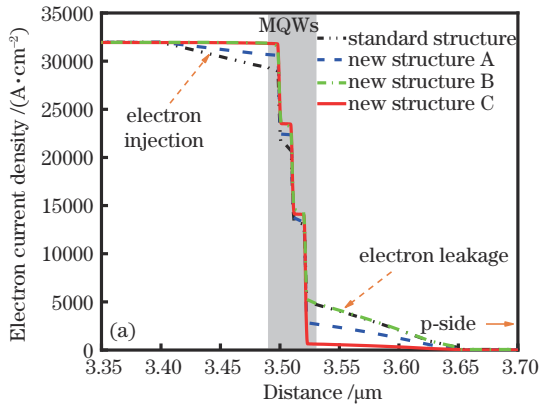


图 6 800 mA 电流注入下 4 种结构的 (a) 电子电流密度和 (b) 空穴电流密度
Fig. 6 (a) Electron current density and (b) hole current density of four structures at current of 800 mA

图 7 是 800 mA 电流注入下 4 种结构的受激辐射复合率,从图中可以看出新结构 C 的受激辐射复合率

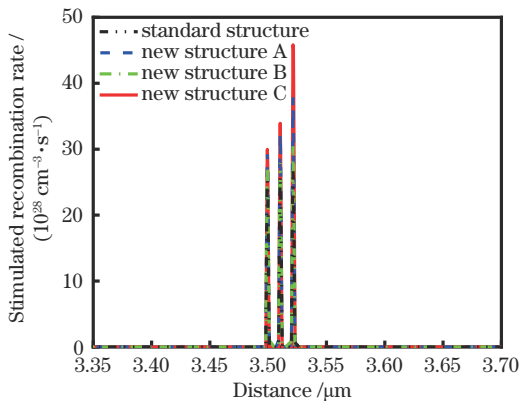


图 7 800 mA 电流注入下 4 种结构的受激辐射复合率
Fig. 7 Stimulated recombination rates of four structures at current of 800 mA

量子阱中,并且由于渐变量子垒的电子和空穴有效势垒高度要高于标准结构,因此可以有效地将更多的电子和空穴留在量子阱中参与辐射复合,减少电子和空穴泄漏出有源区。

图 6(a) 和 6(b) 是 4 种结构的电子、空穴电流密度分布,从图 6(a) 中可以看出,新结构 A、B 和 C 都能不同程度地促进电子注入量子阱,新结构 B 和 C 会有更多的电子注入并且新结构 A 和 C 会使更少的电子泄露出量子阱区,而新结构 B 有更多的电子注入与标准结构相同的电子泄漏;从图 6(b) 中可以看出新结构 A 和 C 可以促进空穴注入有源区,而新结构 A、B 和 C 可以抑制空穴的泄漏到 n 型层;说明 Al 组分渐变的 (Al_{0.2-0.12}Ga_{0.8-0.88}N) 量子垒具有促进电子和空穴注入以及抑制电子和空穴泄漏的作用,而 Al 组分渐变的 n 型波导层对于空穴的泄漏限制作用也很明显,并且可以促进电子的注入。综上所述,新结构 C 同时具有 Al 组分渐变的量子垒层和 n 型波导层,因此将更多的载流子留在了有源区发生受激辐射复合发光。载流子电流密度分布图的分析结果与前文中对能带结构图的分析结果是一致的。

明显高于标准结构,并且新结构 A 和 B 较之标准结构的辐射复合率也有一定幅度的增加。再次证明上述结论,叠加使用 Al 组分为 0.20~0.12 渐变量子垒层和 Al 组分为 0.3~0.2 渐变 n 型波导层的结构 C 能显著改善标准结构的激光器性能,在 4 种结构中为最优结构。

4 结 论

通过在 AlGaIn 基紫外激光器引入新型的 Al 组分渐变前 3 个量子垒层(保持平均 Al 组分为 0.16 与标准结构一致)和 Al 组分渐变 n 型波导层结构进行优化研究,通过仿真模拟对构建的 4 种不同结构进行数值分析。结果显示,渐变的较高 Al 组分 n 型波导层具有促进电子注入和抑制空穴泄漏的作用,而 Al 组分渐变的量子垒层具有促进电子和空穴注入以及抑制电子和空穴泄漏的作用,并且两种结构叠加具有更优异的性能,如具有较低的阈值电流、更高的斜率效率、更高的输出

光功率等。因此本文提出的新结构可以实现紫外激光器的性能提升。

参 考 文 献

- [1] Ben Y H, Liang F, Zhao D G, et al. Different influence of InGaN lower waveguide layer on the performance of GaN-based violet and ultraviolet laser diodes[J]. *Superlattices and Microstructures*, 2019, 133: 106208.
- [2] Shen C, Ng T K, Leonard J T, et al. High-modulation-efficiency, integrated waveguide modulator-laser diode at 448 nm[J]. *ACS Photonics*, 2016, 3(2): 262-268.
- [3] Tian A Q, Hu L, Zhang L Q, et al. Design and growth of GaN-based blue and green laser diodes[J]. *Science China Materials*, 2020, 63(8): 1348-1363.
- [4] 盛彬彬, 王玲, 许金通, 等. 利用 AlGaIn 薄膜透射谱提取材料参数的研究[J]. *光学学报*, 2021, 41(3): 0313001. Sheng B B, Wang L, Xu J T, et al. Extraction of material parameters by transmission spectra of AlGaIn film[J]. *Acta Optica Sinica*, 2021, 41(3): 0313001.
- [5] Ben Y H, Liang F, Zhao D G, et al. The role of InGaIn quantum barriers in improving the performance of GaN-based laser diodes[J]. *Optics & Laser Technology*, 2022, 145: 107523.
- [6] Moustakas T D, Paiella R. Optoelectronic device physics and technology of nitride semiconductors from the UV to the terahertz[J]. *Reports on Progress in Physics*, 2017, 80(10): 106501.
- [7] 彭秀林, 杨昌盛, 邓华秋, 等. 蓝绿光单频激光器研究进展[J]. *激光与光电子学进展*, 2020, 57(7): 071606. Peng X L, Yang C S, Deng H Q, et al. Research progress of blue-green single-frequency laser[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2020, 57(7): 071606.
- [8] 胡磊, 张立群, 刘建平, 等. 高功率氮化镓基蓝光激光器[J]. *中国激光*, 2020, 47(7): 0701025. Hu L, Zhang L Q, Liu J P, et al. High power GaN-based blue lasers[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2020, 47(7): 0701025.
- [9] Endert H, Scaggs M, Basting D, et al. New ultraviolet lasers for material processing in industrial applications[J]. *Journal of Laser Applications*, 1999, 11(1): 1-6.
- [10] Liu J X, Qie H R, Sun Q, et al. Enhanced carrier confinement and radiative recombination in GaN-based lasers by tailoring first-barrier doping[J]. *Optics Express*, 2020, 28(21): 32124-32131.
- [11] Li D B, Jiang K, Sun X J, et al. AlGaIn photonics: recent advances in materials and ultraviolet devices[J]. *Advances in Optics and Photonics*, 2018, 10(1): 43.
- [12] Hardy M T, Feezell D F, DenBaars S P, et al. Group III-nitride lasers: a materials perspective[J]. *Materials Today*, 2011, 14(9): 408-415.
- [13] Aoki Y, Kuwabara M, Yamashita Y, et al. A 350-nm-band GaN/AlGaIn multiple-quantum-well laser diode on bulk GaN[J]. *Applied Physics Letters*, 2015, 107(15): 151103.
- [14] Hou Y F, Zhao D G, Liang F, et al. Enhancing the efficiency of GaN-based laser diodes by the designing of a p-AlGaIn cladding layer and an upper waveguide layer[J]. *Optical Materials Express*, 2021, 11(6): 1780-1790.
- [15] Hou Y F, Zhao D G, Liang F, et al. Performance improvement of GaN-based blue and ultraviolet double quantum well laser diodes by using stepped-doped lower waveguide[J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2021, 121: 105355.
- [16] Xing Z Q, Zhou Y J, Liu Y H, et al. Reduction of electron leakage of AlGaIn-based deep ultraviolet laser diodes using an inverse-trapezoidal electron blocking layer [J]. *Chinese Physics Letters*, 2020, 37(2): 67-71.
- [17] Yoshida H, Yamashita Y, Kuwabara M, et al. Demonstration of an ultraviolet 336 nm AlGaIn multiple-quantum-well laser diode[J]. *Applied Physics Letters*, 2008, 93(24): 241106.
- [18] Detchprohm T, Li X, Shen S C, et al. III-N wide bandgap deep-ultraviolet lasers and photodetectors[J]. *Semiconductors and Semimetals*, 2017, 96: 121-166.
- [19] Cai X F, Li S P, Kang J Y. Improved characteristics of ultraviolet AlGaIn multiple-quantum-well laser diodes with step-graded quantum barriers close to waveguide layers [J]. *Superlattices and Microstructures*, 2016, 97: 1-7.
- [20] Fiorentini V, Bernardini F, Ambacher O. Evidence for nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloy heterostructures[J]. *Applied Physics Letters*, 2002, 80(7): 1204-1206.
- [21] Li X, Zhao D G, Jiang D S, et al. The effectiveness of electron blocking layer in InGaIn-based laser diodes with different indium content[J]. *Physica Status Solidi (a)*, 2016, 213(8): 2223-2228.
- [22] Kuo Y K, Chang J Y, Chen F M, et al. Numerical investigation on the carrier transport characteristics of AlGaIn deep-UV light-emitting diodes[J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2016, 52(4): 3300105.